

Следует отметить, что дневной свет здесь является переменной величиной, обладающий максимальным своим значением в полуденное время (рис. 1, б) и два промежуточных состояния, когда необходимо подключить свет 1-го или 2-го ряда светильников, освещенность рабочих мест при этом необходимо сохранять постоянной. Посредством инструментов DIALux по формированию сцен освещения с элементами управления (задание параметров дневного света, коэффициентов затемнения светильников) удалось показать преимущество использования естественной освещенности в формате одного помещения. Подбор параметров при проектировании учитывает также географическое местонахождение объекта, что позволяет оценить и спрогнозировать освещение по формату светового дня и предусмотреть требуемое управление освещением, в том числе и при планировании рабочих мест.

Достижение оптимальной работы осветительной установки при экономии расходов электроэнергии на освещение возможно осуществить, применяя электронные автоматические системы управления, которые способны обеспечивать разные функциональные задачи: точное поддержание искусственной освещенности и климатических параметров в помещении на заданном уровне; учитывать присутствие естественной освещенности в помещении; контролировать время суток и дни недели; реагировать на присутствие людей в помещении; осуществлять дистанционное беспроводное управление осветительной установкой. Вопрос персонализации и интеллектуального контроля освещением не оставляет сомнений внедрения [1] и массовой реализации в самом ближайшем будущем.

Список публикаций:

[1] Эволюция света: от лампы накаливания к smart-освещению. 2018. Условия доступа: <https://www.forbes.ru/article/361483-evolyuciya-sveta-ot-lampy-nakalivaniya-k-smart-osveshcheniyu>

О связи физико-химических свойств сложных углеводородных веществ с интегральными автокорреляционными характеристиками спектров

Доломатова Милана Михайловна

Башкирский государственный университет,

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Бахтизин Рауф Загидович, д.х.н.

milana.1992@mail.ru

Согласно теории А.М. Бутлерова, свойства вещества определяются структурой его молекул и функциональными группами органических соединений. Модели, позволяющими прогнозировать различные свойства веществ именуются QSPR моделями (Quantitative Structure-Property Relationship). В этих моделях в качестве параметров определяющих физико-химические и биологические свойства используются векторные числовые величины, которые называются дескрипторами

В работах авторов, выполненных в последние годы [1,2], предложены дескрипторы, учитывающие химическую и электронную структуру молекул, отличающихся высокой дискриминирующей способностью и экспериментально определяемые по интегральным характеристикам спектров в видимой и УФ области. К таким дескрипторам относятся интегральные параметры оптических спектров, в дальнейшем назовем их интегральные спектроскопические дескрипторы (ИПД). Применение таких дескрипторов следует из основных законов квантовой механики. Энергетический дискретный спектр молекул, как известно, определяется собственными значениями матрицы Фока [3]:

$$F\Psi = E\Psi \quad (1)$$

В соответствии с правилами квантовой механики среднее значение любого свойства выражается через оператора свойства f и волновую функцию:

$$\langle f(x) \rangle = \int f(x) \cdot |\psi(x)|^2 dx, \text{ т.к. } |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x), \quad (2)$$

Из уравнения (2) следует, что интегральное изменение волновой функции, зависящей от природы молекул, оказывает влияние на спектроскопические и макроскопические свойства веществ. Иными словами, изменение свойств связано с изменением интегрального спектра электронных состояний. Изменение структуры молекул, как правило, приводит к изменению Фокиана F и его собственных значений, передающих спектр. Таким образом, из квантовой механики следует существование эффектов, связывающих интегральные спектральные характеристики и различные физические свойства вещества, которые мы определим по аналогии с закономерностями «структура - свойства».

Автокорреляционные функции (АКФ) используются для анализа статистических особенностей сигналов в радио и СВЧ области спектра [4], а также решения задач в оптической спектроскопии [5]. Будем рассматривать значение АКФ в качестве меры взаимодействия электронных состояний молекулы. Формула для вычисления АКФ имеет вид:

$$A_C = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (3)$$

где $S(\omega)$, $S(\omega + \Delta\omega)$ – частотные функции распределения интенсивностей поглощения излучения в видимом и УФ спектре на частотах ω и $\omega + \Delta\omega$, соответственно.

Автокорреляционную функцию можно выразить через резонансные частоты, используя теорему Винера-Хинчина:

$$A_C = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega} dF(\omega), \quad F(\omega) = a^2 F_\Omega(\omega), \quad (4)$$

где $F_\Omega(\omega)$ – производная функция распределения, a^2 – произвольное положительное число. Формула (4) устанавливает непосредственную связь между энергетическим спектром резонансных электронных состояний и автокорреляционной функцией.

Поскольку в данной работе статистический анализ спектра включает ближнюю УФ и видимую области в диапазоне 6,53..10,63 эВ (190..760 нм), то АКФ заменяется интегральным параметром от этой функции, который представляет из себя определенный интеграл, имеющий конкретное числовое значение. Обозначим его как интегральный параметр автокорреляционной функции (ИАКП):

$$I_A = \int_{\omega_1}^{\omega_2} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (5)$$

$$I_A = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{E_1}^{E_n} \lg \varepsilon(E) \cdot \lg \varepsilon(E + \Delta E) dE. \quad (6)$$

Установлена связь между ИАКП для электронного спектра поглощения и совокупностью равновесных ФХС системы для атомов и молекул. В квазилинейном приближении эти закономерности имеют вид:

$$\Delta Z = \gamma \Delta I_A, \quad (7)$$

где ΔZ – изменение макроскопического физико-химического свойства системы, поглощающей излучение, в единицах измерений свойств; ΔI_A – ИАКП.

Соотношение (7) подтверждено многочисленными экспериментами [2].

В отличие от обычных физико-химических и квантово-механических дескрипторов предлагаемые дескрипторы могут быть применены к исследованию многокомпонентных систем с неизвестной структурой и составом. Особенностью интегральных спектральных дескрипторов является их применимость не только к обычным молекулам, но и к очень сложным веществам, состоящим из огромного количества компонентов, например нефтяным системам и биологическим жидкостям. Практическое использование новых дескрипторов позволит сократить количество измерений различных свойств сложных веществ, например, нефтей и нефтепродуктов, биологических жидкостей, геномов, белков, биополимеров.

Список публикаций:

- [1] Доломатов М. Ю., Ковалева Э. А., Латыпов К. Ф., Доломатова М. М., Ярмухаметова Г. У. и Паймурзина Н. Х. // *Бутлеровские сообщения*. 2019. Т.57. №1. С. 1-14.
- [2] Доломатов М.Ю., Ярмухаметова Г.У., Доломатова М.М. // *Прикладная спектроскопия*. 2017. Т. 84, №1, С.132-137.
- [3] Степанов Н.Ф. *Квантовая механика и квантовая химия*. М.: Мир. 2001. 519с.
- [4] Тихонов В.И. *Статистическая радиофизика*. Москва: Радио и связь. 1982. 625с.
- [5] Шмидт В. *Оптическая спектроскопия для химиков и биологов*. Москва: Техносфера. 2007. С.189-194.